ハバードモデルにおける局在スピンの温度変化と相転移(基研研究会「電子相関と金属非金属転移」報告)

酒向, 正彦; 志水, 正男

ハバードモデルにおける局在スピンの温度変化と相転移

名大工　酒向正彦
志水正男

電子が半分詰った軌道縮退の無いハバードバンドの有限温度における電子構造と磁気的性質を，汎関数積分法[1]によって調べた。まず分配関数を次のように求めた。ハバードハミルトニアンの格子点 i における二体相互作用の部分について，

$$n_{i\uparrow}\, n_{i\downarrow} = \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) - \frac{1}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2 \ , \tag{1}$$

の変形を行う。そして右辺第２項について Stratonovich–Hubbard変換を用い分配関数を用い分配関数を書き表わす。その際ハミルトニアン内各項の非可換性に対してFeynman time–ordering trick を用いる。すると分配関数は，電子間相互作用が各格子点に磁気ポテンシャル $\sqrt{2\pi U}\ \xi_i(\tau)$ を持つ一体問題の形で書き表わされる。ここでUは原子内クーロン相互作用の大きさを表わす。τ は random magnetic field ξ_i が時間依存性を持つことを表わす。しかしこの時間依存性を無視する static 近似を行う。以上の手順により分配関数は次のようになる。

$$z = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int \prod_{i=1}^{N} d(\sqrt{\beta}\ \xi_1)\ \exp[-\beta F(\xi_1, \cdots, \xi_N)], \tag{2}$$

ここで β は温度 $k_B T$ の逆数，Nは全格子点の数である。そして free energy functional $F(\xi_1, \cdots, \xi_N)$ は random magnetic field の作用している結晶中を走るスピン関数 $G^{\sigma}_{ii}(E;\xi_1, \cdots, \xi_N)$ を用いて次のように書き表わされる。

$$F(\xi_1, \cdots, \xi_N) = \pi \sum_{i=1}^{N} \xi_i^2 - \frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{\infty} dE\ \ell n\{1 + \exp[\beta(\zeta - \frac{U}{2} - E)]\}$$

$$\times [(-1/\pi) \sum_{i\sigma} \mathscr{I}_m\ G^{\sigma}_{ii}(E;\xi_1, \cdots, \xi_N)]\ , \tag{3}$$

ここで ζ はケミカルポテンシャルを表わす。この $G^{\sigma}_{ii}(E;\delta_1,\cdots,\xi_N)$ をコヒーレントポテンシャル $\Sigma^{\sigma}(E)$ 中を走る一電子のグリーン関数 $\mathscr{g}^{\sigma}_{ij}(E)$ と散乱の t-matrix $t^{\sigma}_i(E;\xi_i)$ によって次のように展開する。

$$G^{\sigma}_{ii}(E;\xi_1,\cdots,\xi_N) = \mathscr{g}^{\sigma}_{ii}(E) + \sum_j \mathscr{g}^{\sigma}_{ij}(E)\ t^{\sigma}_j(E;\xi_j)\,\mathscr{g}^{\sigma}_{ji}(E)$$
$$+ \sum_{j \neq n} \mathscr{g}^{\sigma}_{ij}(E)\ t^{\sigma}_j(E;\xi_j)\,\mathscr{g}^{\sigma}_{jn}(E)\ t^{\sigma}_n(E;\xi_n)\,\mathscr{g}^{\sigma}_{ni}(E) + \cdots, \tag{4}$$

そして $\Sigma^{\sigma}(E)$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int \prod_{j=1}^{N} d(\sqrt{\beta}\ \xi_j)\ G^{\sigma}_{ii}(E;\xi_1,\cdots,\xi_N)\,P(\xi_1,\cdots,\xi_N) = \mathscr{g}^{\sigma}_{ii}(E), \tag{5}$$

より決められる。ここで random magnetic field の分布関数 $P(\xi_1,\cdots,\xi_N)$ は前出の $F(\xi_1,\cdots,\xi_N)$ によって次のように与えられる。

$$P(\xi_1,\cdots,\xi_N) = \frac{\exp\left[-\beta F(\xi_1,\cdots,\xi_N)\right]}{\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int \prod_{i=1}^{N} d(\sqrt{\beta}\ \xi_i)\ \exp\left[-\beta F(\xi_1,\cdots,\xi_N)\right]} \tag{6}$$

(3) から (6) までの連立式を具体的に解くことはNの値が大きい場合不可能である。ここで (4) 式において右辺第3項以上を無視する近似を行う。atomic limit の場合は近似とはならない。そして analytic に解ける。この近似を行うと異った格子点上の磁気モーメント間の相互作用が考慮されないので，long-range order は出現せず，常磁性状態に取り扱いが限られる。$\Sigma^{\sigma}(E) \equiv \Sigma(E)$ そして $\mathscr{g}^{\sigma}_{ij}(E) \equiv \mathscr{g}_{ij}(E)$ とする。

$$\left.\begin{aligned} P(\xi_1,\cdots,\xi_N) &= \prod_{i=1}^{N} P(\xi_i), \\ F(\xi_1,\cdots,\xi_N) &= \sum_{i=1}^{N} P(\xi_i), \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

となって，ここで，

$$P(\xi_i) = \exp[-\beta F(\xi_i)]\{\int_{-\infty}^{\infty} d(\sqrt{\beta}\,\xi_i)\ \exp[-\beta F(\xi_i)]\}^{-1}. \tag{8}$$

$$F(\xi_i) = F^{(1)} + F^{(2)}(\xi_i), \tag{9}$$

$$F^{(1)} = -\frac{2}{\beta}\int_{-\infty}^{\infty} dE\ \ell n\ \{1+\exp[\beta(\zeta-\frac{U}{2}-E)]\}[(-1/\pi)\,\mathscr{I}_m\, \mathcal{g}_{ii}(E)], \tag{10}$$

$$F^{(2)} = \pi\ \xi_i^{\,2} - \frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{\infty} dE\ \ell n\ \{1+\exp[\beta(\zeta-\frac{U}{2}-E)]\}$$

$$\times\ \{(-1/\pi)\sum_{j\sigma}\mathscr{I}_m[t_i^{\sigma}(E;\xi_i)\,\mathcal{g}_{ij}(E)\,\mathcal{g}_{ji}(E)]\}, \tag{11}$$

となり，$\Sigma(E)$ を決める条件式は，

$$\int_{-\infty}^{\infty} d(\sqrt{\beta}\,\xi_i)\ t_i^{\sigma}(E;\xi_i)\,P(\xi_i) \equiv \langle t_i^{\sigma}(E;\xi_i)\rangle_{\xi} = 0, \tag{12}$$

と表わされ，帯磁率は次の式で与えられる。

$$\chi(T) = (\mu_B^2 N/U)[2\pi\beta\langle\xi_i^{\,2}\rangle_{\xi}-1]. \tag{13}$$

数値計算は簡単のため，相互作用していない系のエネルギーバンド幅W の半円型を仮定した。計算結果は次のようである。まず $T=0K$ においては，$U/W < 0.29$ では磁気モーメントの大きさが零で，U/W の値に依存しない。これは static 近似がまったく不適当なためである。$U/W > 0.35$ でエネルギーバンドはギャップを持つ。$U/W = 0.5$ について $P(\xi_i)$，状態密度，自由エネルギー，帯磁率，比熱の温度変化を求めた。$T=0K$ では状態密度にギャップがあり絶縁状態である。そして $P(\xi_i)$ は ± スピンの局在モーメントに対応した ξ_i の値で２個の δ 関数型の分布を示す。温度が少し上昇すると有限の分布の幅を持ち，状態密度のギャップは滑らかに消えてゆく。したがって明確な金属絶縁体転移は無い。さらに温度が上昇すると，$P(\xi_i)$ の２個のピークは $k_BT/W = 0.21$ で $\xi_i = 0$ における１個のピークになってしまう。局在モーメントはこの温度で消失すると考える。この $P(\xi_i)$ の温度変化の様子は相転移の無い atomic limit の場合と大体同じであるが，次の点で異る。$\langle\xi_i^{\,2}\rangle_{\xi}$ の温度変化

を計算するとこの局在モーメント消失温度近傍では，random magnetic field の熱ゆらぎの増加がある。これが帯磁率の温度変化に小さな異常（$\chi(T)^{-1}$ の曲線が軽く折れ曲る）を与えている。自由エネルギーの温度変化は atomic limit の場合と大体似ている。$k_B T/W \lesssim 0.21$ では温度変化が $F^{(2)}(\xi_i)$ からの寄与（局在的）に特長づけられ $k_B T/W \gtrsim 0.21$ では $F^{(1)}$ からの寄与（バンド的）に特長づけられている。比熱の温度変化については，$k_B T/W \simeq 0.2$ に1個のピークを持つ。

（尚，この話の詳しい内容は J. Phys. Soc. Japan **40**（1976）Apr. に掲載される予定です。）

参考文献

1） W. E. Evenson, J. R. Schrieffer and S. Q. Wang: J. Appl. Phys. 41（1970）1199

電子相関による金属非金属転移

川　畑　有　郷

金属非金属転移は色々な物質に見られ，[1] その様子は物質により色々である。そのメカニズムも物質により異なると思われるが，ここでは V_2O_3 について考える。問題にするのは，paramagnetic な金属相と絶縁体相の boundary である。この phase boundary は critical point をもつので [2] gas−liquid transition と同様に，金属と絶縁体の間には本質的な差はないと考えられる。モデルとしては，Hubbard モデルをとり，

$$\mathscr{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c^{+}_{i\sigma} c_{j\sigma} + I \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \tag{1}$$

transfer energy t_{ij} が系の体積によるとする。実験的には，転移は圧力によって起こっており，転移に際して体積変化が見られるのでこのようなモデルを取った。系の自由エネルギー F (V)（V は系の体積）は

$$\frac{\partial F}{\partial V} = \sum_{t,j,\sigma} (\partial t_{ij}/\partial V) \langle c^{+}_{i\sigma} c_{j\sigma} \rangle$$

で与えられる。t_{ij} を nearest neighbour のみにとり，相互作用のない時のバンド巾 $\triangle$ が t_{ij} に比例することに注意すると，